

стями Co(0001) и Ni(111), а также установлено наличие спиновой поляризации в данных системах.

ГЕТЕРОНАНОТРУБКИ С ДВОЙНЫМИ СТЕНКАМИ

Тихонова Л.В.

Сибирский федеральный университет
660041, г. Красноярск, пр. Свободный, д. 79

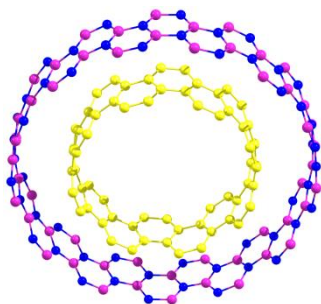
В настоящее время большое внимание уделяется изучению наноматериалов, среди которых нанотрубки всегда вызывали особый интерес. В 2013 году авторы статьи [1] опубликовали результаты о получении гетеронанотрубок с двойными стенками. Такие трубки могут послужить хорошим материалом для создания наноустройств.

Нами были рассмотрены барьеры вращения и скольжения внешней трубки относительно внутренней для трубок C(8,8)@BN(13,13) и C(9,0)@BN(18,0). Квантовохимические расчеты проводились в лицензионном программном пакете VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) в рамках метода функционала плотности (Density Functional Theory) с использованием базиса плоских волн и PAW формализма. Вычисления проводились в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) – обменно-корреляционного функционала PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof).

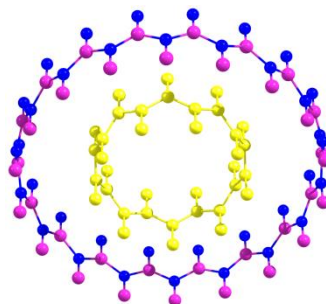
На первом этапе исследования проводили подбор внешней трубки из нитрида бора для углеродной трубки с хиральностью (8,8). При этом в качестве внешних трубок были рассмотрены трубки BN(11,11), BN(12,12), BN(13,13) и BN(14,14). Результаты расчетов показали, что наиболее энергетически выгодной является трубка, состоящая из C(8,8) и BN(13,13), с межатрубным расстоянием 3,6 Å.

Трубка	$E = E_{C(n,n)@BN(m,m)} - E_{C(n,n)} - E_{BN(m,m)}$ $E = E_{C(n,n)@BN(m,m)} - E_{C(n,n)} - E_{BN(m,m)}$ $E = E_{C(n,n)@BN(m,m)} - E_{C(n,n)} - E_{BN(m,m)}$, эВ
C(8,8)@BN(11,11)	3,986
C(8,8)@BN(12,12)	-1,471
C(8,8)@BN(13,13)	-1,805
C(8,8)@BN(14,14)	-1,005

Для трубки-zigzag была подобрана пара с аналогичным межатрубным расстоянием (C(9,0)@BN(18,0), $E = -2,13$ эВ).



C(8,8)@BN(13,13)



C(9,0)@BN(18,0)

Атомные конфигурации гетеронанотрубок.

Далее оценивали барьеры вращения и скольжения трубок. Расчеты показали, что барьеры вращения трубок малы (0,010 эВ для трубки C(8,8)@BN(13,13) и 0,001 эВ для трубки C(9,0)@BN(18,0)), что говорит о том, что трубки могут легко вращаться друг относительно друга. То же самое и с барьерами скольжения (0,012 эВ для трубки C(8,8)@BN(13,13) и 0,066 эВ для трубки C(9,0)@BN(18,0)). Результаты исследования дают предпосылки использования гетеронанотрубок, состоящих из внутренней углеродной нанотрубки и внешней нанотрубки из нитрида бора, для создания нанодвигателей.

1. Nakanishi R., Kitaura R., Warner J.H. et al. Thin single-wall BN-nanotubes formed inside carbon nanotubes // Scientific Reports. 2013. № 3. P. 1–6.

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ФОСФАТА ОЛОВА (II), МОДИФИЦИРОВАННОГО АЦЕТАТОМ МЕДИ

Федорова Л.С., Димова Л.М.

Иркутский государственный университет
664003, г. Иркутск, ул. К. Маркса, д. 1

Сравнительно молодое, но интенсивно развивающееся направление в химии – химия ионообменных материалов. В последние годы наблюдается всплеск в области химии сорбентов.

Целью данной работы является синтез фосфата олова (II), исследование его структуры и сорбционных свойств комплексом физико-химических методов.